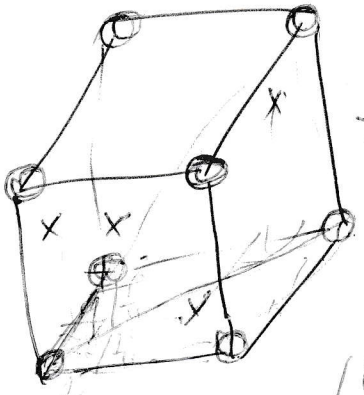
structures diamant : [C] :



4 C.f.c : $(\frac{1}{4}\frac{1}{4}0)(0\frac{1}{2}\frac{1}{2})(\frac{1}{2}0\frac{1}{2})(0\,0\,0)$

+ 4 diamant : $(\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4})(\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4})(\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4})(\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4})$

C, Si, Ge

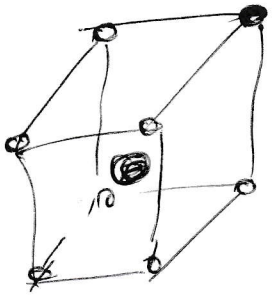
$(4r)^2 = 3a^2$

$(2r)^2 = 3\left(\frac{a}{4}\right)^2 \rightarrow r = \frac{\sqrt{3}}{8}a$

$C = 0{,}134$

★ Etude de quelques structures composées :

structures de type $CsCl$



Cl^- : $(0,0,0)$

Cs^+ : $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

$n_{Cl^-} = 1$, $n_{Cs^+} = 1$

$n_{CsCl} = 1$; $z = 8$ → coordinence

★) Condition de stabilité de la structure AB :

→ Les sites interstitiels occupés doivent respecter un domaine de stabilité caractérisé par les valeurs de ρ suivantes :

Coordinance	sites	domaine de stabilité
8	cubiques	$\sqrt{3}-1 < \rho \leq 1$
6	octaédriques	$\sqrt{2}-1 \leq \rho \leq \sqrt{3}-1$
4	tetraedriques	$\sqrt{\frac{3}{2}}-1 < \rho \leq \sqrt{2}-1$

$\rho = \frac{R}{r}$ / R est le rayon des anions B
r est generalement le rayon des cations A

$R \equiv r^-$ / $r \equiv r^+$

Exemples de structures de type Cs Cl; $r^+ + r^- = \frac{\sqrt{3}}{2} a$

Composé	CsCl	CsBr	CsI
$\frac{r^+}{r^-}$			

★ structure type NaCl;

Cl^- : $(0,0,0)$, $(\frac{1}{a}\frac{1}{a}0)$ $(\frac{1}{a}0\frac{1}{a})$ $(0\frac{1}{a}\frac{1}{a})$
Na^+ : $(\frac{1}{a}00)$, $(0\frac{1}{a}0)$ $(00\frac{1}{a})$ $(\frac{1}{a}\frac{1}{a}\frac{1}{a})$

$n_{Cl^-} = 4$, $n_{Na^+} = 4$ / $n_{NaCl} = 4$

$z = 6$

$2(r^+ + r^-) = a$

Exemples de structures de type NaCl :

Composé : LiF, NaF, $NaBr$, KCl, ...

* structure de type ZnS :

→ Le sulfure de zinc peut avoir deux types de structures :

ZnS ⟨ → la blende (cubique à basse température)
     → la wurtzite (hexagonal à haute ″)

1) ZnS (Blende) :

S^{2-} : $(0,0,0)\ (\frac{1}{2}\frac{1}{2}0)\ (\frac{1}{2}0\frac{1}{2})\ (0\frac{1}{2}\frac{1}{2})$

Zn^{2+} : $(\frac{1}{4},\frac{1}{4},\frac{1}{4}),\ (\frac{3}{4},\frac{3}{4},\frac{1}{4}),\ (\frac{1}{4},\frac{3}{4},\frac{3}{4}),\ (\frac{3}{4},\frac{1}{4},\frac{3}{4})$

$Z=4$ / $n_{S^{2-}}=4$, $n_{Zn^{2+}}=4$ / $n_{ZnS}=4$

$$r^+ + r^- = \frac{\sqrt{3}}{4}a$$

Exemple de ZnS

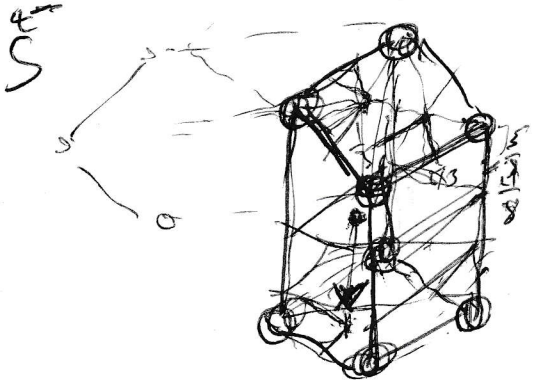
Composés : SiC, AgI, $AlAs$, ZnO, CdS, ...

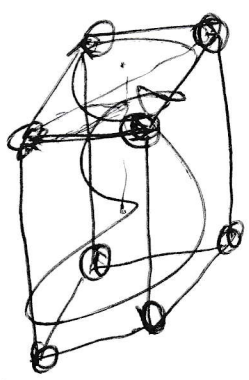
2) ZnS (Wurtzite) :

S^{2-} : $(0,0,0),\ (\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{2})$

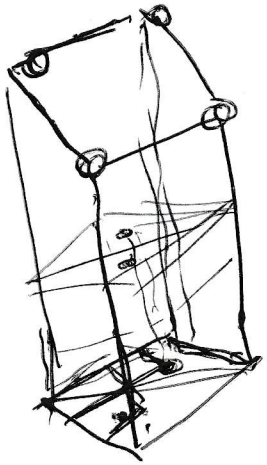
Zn^{2+} : $(\frac{2}{3},\frac{1}{3},\frac{1}{8})$

$(0,0,\frac{5}{8})$





4) structure de type Ni AS !



AS : (0,0,0) ; $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$

Ni : $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}), (\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{3}{4})$

$z = 6$

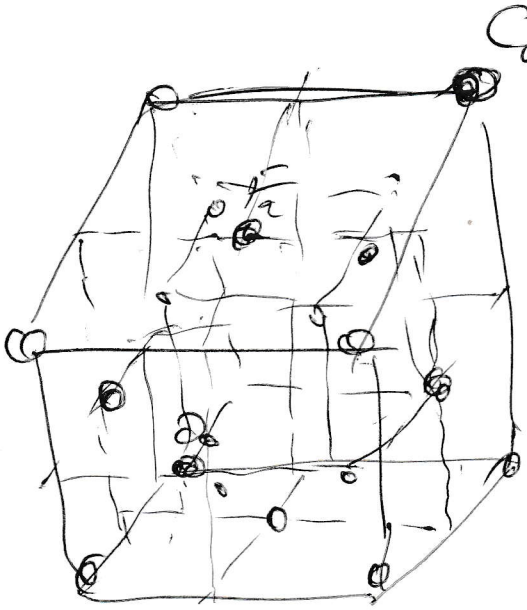
AS : 6, Ni : 6

---

5) composés de type ABZ ;

structure de type Fluorine : ~~CaF2~~

Ca^{+2}, F^-



$z = 8 ; 4$

$r^+ + r^- = \frac{\sqrt{3}}{4} a$

~~F : (0,0,0), (~~

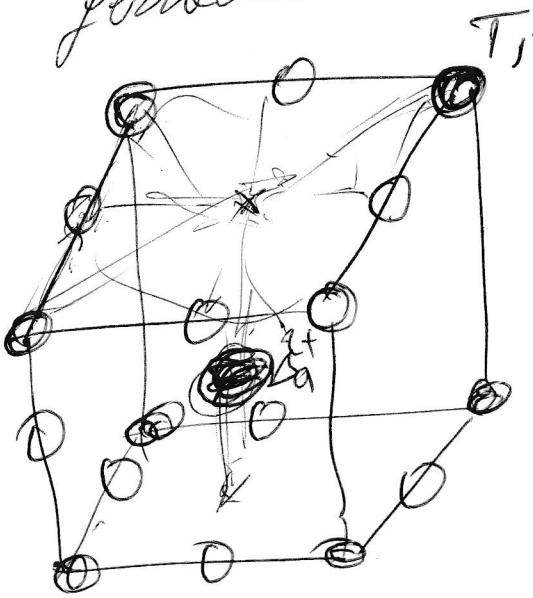
Ca : (0,0,0), $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} 0), (0 \frac{1}{2} \frac{1}{2}), (\frac{1}{2} 0 \frac{1}{2})$

F $(\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}) (\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4}), (\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}), (\frac{3}{4} \frac{1}{4} \frac{3}{4})$

$(\frac{1}{4} \frac{3}{4} \frac{1}{4})$, — — — —

A) ~~structure de type~~ Rutile : TiO_2

Les composés de structure de type pérovskite ($BaTiO_3$, $CaTiO_3$, $SrTiO_3$) ~~→~~ ferroélectrique $NaNbO_3$ →



Ti^{4+} : (0,0,0)

Ba^{2+} : $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$

O^{2-} : $(\frac{1}{2}, 0, 0)$. $(0, \frac{1}{2}, 0)$ $(0, 0, \frac{1}{2})$